UNIVERSITE ABDELMALEK ESSAADI
ENSA - Tétouan

Année 2011/2012
1ère année classe préparatoire

TD DE CHIMIE GENERALE
ATOMISTIQUE
SERIE N° 3

Exercice I

Etablir l'expression de l'équation de schrodinger pour les systèmes suivants :

a) L'atome d'hydrogène.

b) L'ion $_3Li^+$, $_2He^+$, $_4Be^{2+}$

Exercice II

Quelles sont les valeurs des nombres quantiques n, l et m caractéristiques des orbitales atomiques : 1s, 2p,3p, 3d, 4d et 4f.

Exercice III

Classer par ordre croissant de leurs énergies les électrons d'un même atome définis par les valeurs suivantes de leurs nombres quantiques. Identifier les sous couches auxquelles ils appartiennent.

1) n = 2 ; l = 1 ; m = 0 ; s = +1/2.
2) n = 3 ; l = 0 ; m = 0 ; s = -1/2.
3) n = 2 ; l = 1 ; m = 0 ; s = -1/2.
4) n = 2 ; l = 0 ; m = 0 ; s = +1/2.
5) n = 2 ; l = 1 ; m = -1 ; s = +1/2.

Exercice IV

a) Donner les valeurs des quatre nombres quantiques caractérisant chacun des électrons de l'oxygène (Z=8) dans son état fondamental.

b) Ecrire à l'aide des cases quantiques, la configuration électronique du carbone (Z=6), du Fluor (Z=9) et de l'Aluminium (Z=13) à l'état fondamental.

Exercice V

Donner la configuration électronique des éléments suivants :

Element :	Mg	S^{2-}	Ca^{2+}	Cr	Cu	Zn^{2+}	Br^-	Cd
Z :	12	16	20	24	29	30	35	48

Exercice VI

Un élément X possède moins de 18 électrons. Quelles sont les configurations électroniques possibles correspondant à X dans les cas suivants:

a) X possède deux électrons célibataires.

b) X possède trois électrons célibataires.

c) X ne possède aucun électron célibataire.

Exercice VII

Donner la configuration électronique des éléments X, Y et W telle que :

a) X possède deux électrons de plus que le Titane (Z=22).

b) Y possède trois électrons célibataires sur la couche L.

c) W possède quatre protons de moins que l'Arsenic (Z=33).



Exercice VIII

Calculer le numéro atomique apparent Z^*_i pour :

a) Chaque électron de l'atome du Fluor (Z=9).

b) L'électron le plus externe des éléments Mg (Z=12), P (Z=15) et V (Z=23).

Exercice IX

Le Cobalt (Z=27) peut donner l'ion Co^{2+} en perdant deux électrons. En utilisant les règles de Slater, déterminer l'énergie d'ionisation du Cobalt en ion Co^{2+}.

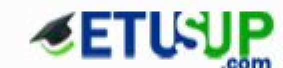
Exercice X

Calculer l'énergie totale de l'atome du Calcium (Z=20).

Données : les valeurs des coefficients d'écran et celles de n*.

	1s	2s2p	3s3p	3d	4s4p	4d	4f	5s5p
1s	0,31							
2s2p	0,85	0,35						
3s3p	1	0,85	0,35					
3d	1	1	1	0,35				
4s4p	1	1	0,85	0,85	0,35			
4d	1	1	1	1	1	0,35		
4f	1	1	1	1	1	1	0,35	
5s5p	1	1	1	1	0,85	0,85	0,85	0,35

n	1	2	3	4	5
n*	1	2	3	3,7	4



TD Serie 3 Atomestique

Exercice 1:

Le principe fondamental de la mécanique quantique est

$\hat{H}\Psi = E\Psi$ éq de Schrodinger

Ψ : fct d'onde décrivant l'e⁻

$\hat{H}$: l'operateur hamillonei

E : l'énergie total

	Mécanique classique	Mécanique quantique
Ec	$\frac{1}{2}mV^2$	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$
Ep	$V = \frac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 r}$	$V = \frac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 r}$

$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$

a) L'atome d'Hydrogine :

$\Rightarrow$ 1 noyau de charge +e et un e⁻ de charge (−e)

$$\begin{cases} \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \\ \hat{V} = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \end{cases}$$

$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\Psi = E\Psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\Psi = E\Psi$$

b) L'ion $_3Li^+$

noyau de charge 3e + et 2 e⁻

On aura les interactions suivantes :

(schéma : noyau 3e ; électrons e_1, e_2 ; distances r_1, r_2, r_{12})

3e → e_1 (attraction)

3e → e_2 (")

e_1 → e_2 (repulsion)

$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$

$\hat{V} = -\frac{3e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1} - \frac{3e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}$

$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \longrightarrow H\Psi = E\Psi$

Donc

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{3e^2}{r_1} + \frac{3e^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}}\right)\Psi = E\Psi$

+ $_2He^+$, l'équation de S

$H\Psi = E\Psi$

on a $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$

$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$

$\hat{V} = \frac{-2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$

$\Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - \frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 r}\Psi = E\Psi$

+ $_4Be^{2+}$ l'équation de Schrodinger

$\hat{H}\Psi = E\Psi$

$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$

$\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta$

$\hat{V} = \frac{-4e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1} - \frac{4e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}$

$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{\pi\varepsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{\pi\varepsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}\right)\Psi = E\Psi$

Exercice 2 :

* n : nbre quantique principal $n \in \mathbb{N}^*$

n définit la couche

n	1	2	3	4	5	6
couche	K	L	M	N	O	P

* l : nombre quantique secondaire

$0 \leq l \leq n-1$

l définit la sous couche ou O,A

l	0	1	2	3
O,A	s	p	d	f

* m : nbre quantique magnétique :

$l \leq m \leq -l$

le nbre de valeurs que prend m représente le nbre d'O.A

l=0 ; m=0 ⇒ 1 OA s

l=1 ; m=-1,0,1 ⇒ 3 OA p

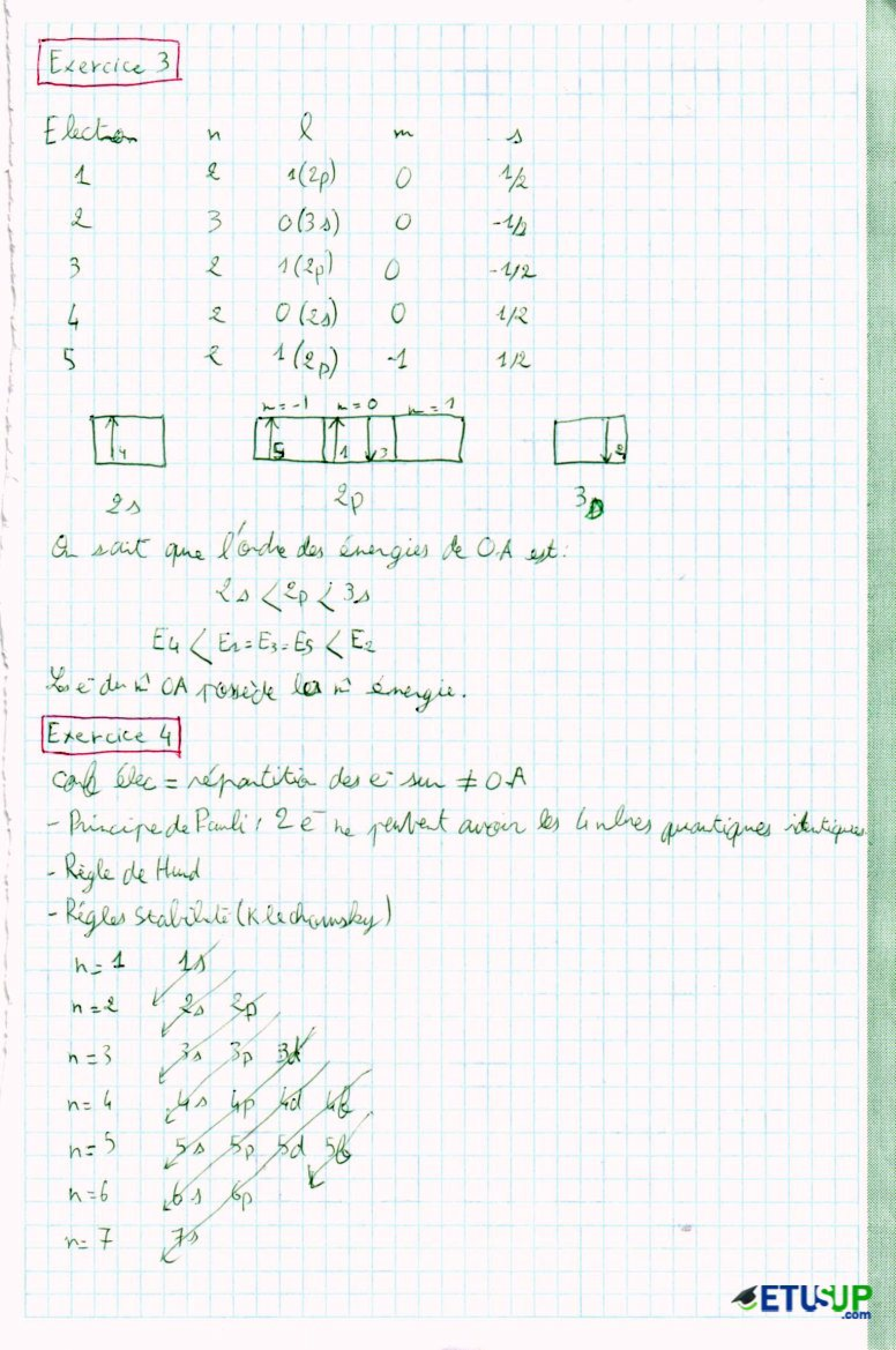
l=2 ; m=-2,-1,0,1,2 ⇒ 5 OA d

l=3 ; m=-3,-2,-1,0,1,2,3 ⇒ 7 OA f

OA	n	l	m
1s	1	0	0
2p	2	1	-1, 0, 1
3p	3	1	-1, 0, 1
3d	3	2	-2, -1, 0, 1, 2
4d	4	2	-2, -1, 0, 1, 2
4f	4	3	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3

Exercice 3

Electron	n	l	m	s
1	2	1(2p)	0	1/2
2	3	0(3s)	0	-1/2
3	2	1(2p)	0	-1/2
4	2	0(2s)	0	1/2
5	2	1(2p)	-1	1/2



On sait que l'ordre des énergies de O.A est :

$$2s < 2p < 3s$$

$$E_4 < E_1 = E_3 = E_5 < E_2$$

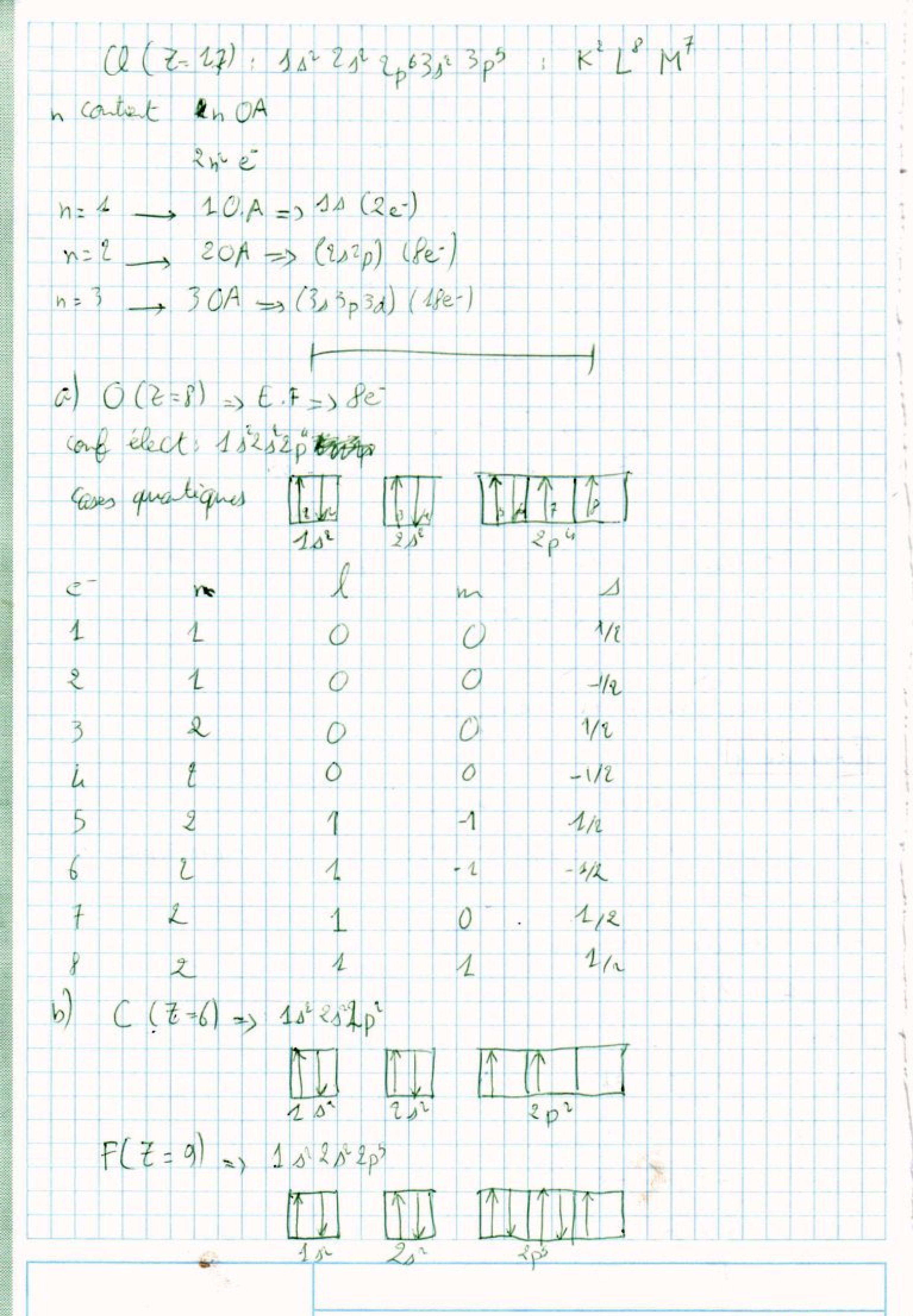
Les e⁻ de m̂ OA possède la m̂ énergie.

Exercice 4

Conf élec = répartition des e⁻ sur ≠ OA

- Principe de Pauli : 2 e⁻ ne peuvent avoir les 4 nbres quantiques identiques
- Règle de Hund
- Règles stabilité (Klechkowsky)

n = 1 1s
n = 2 2s 2p
n = 3 3s 3p 3d
n = 4 4s 4p 4d 4f
n = 5 5s 5p 5d 5f
n = 6 6s 6p
n = 7 7s



Cl (Z=17) : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$: $K^2 L^8 M^7$

n contient n OA

$2n^2$ e^-

n = 1 ⟶ 1 O.A ⇒ 1s ($2e^-$)

n = 2 ⟶ 2OA ⇒ (2s 2p) ($8e^-$)

n = 3 ⟶ 3 OA ⇒ (3s 3p 3d) ($18e^-$)

a) O (Z=8) ⇒ E.F ⇒ $8e^-$

conf élect : $1s^2 2s^2 2p^4$

cases quantiques

$1s^2$ $2s^2$ $2p^4$

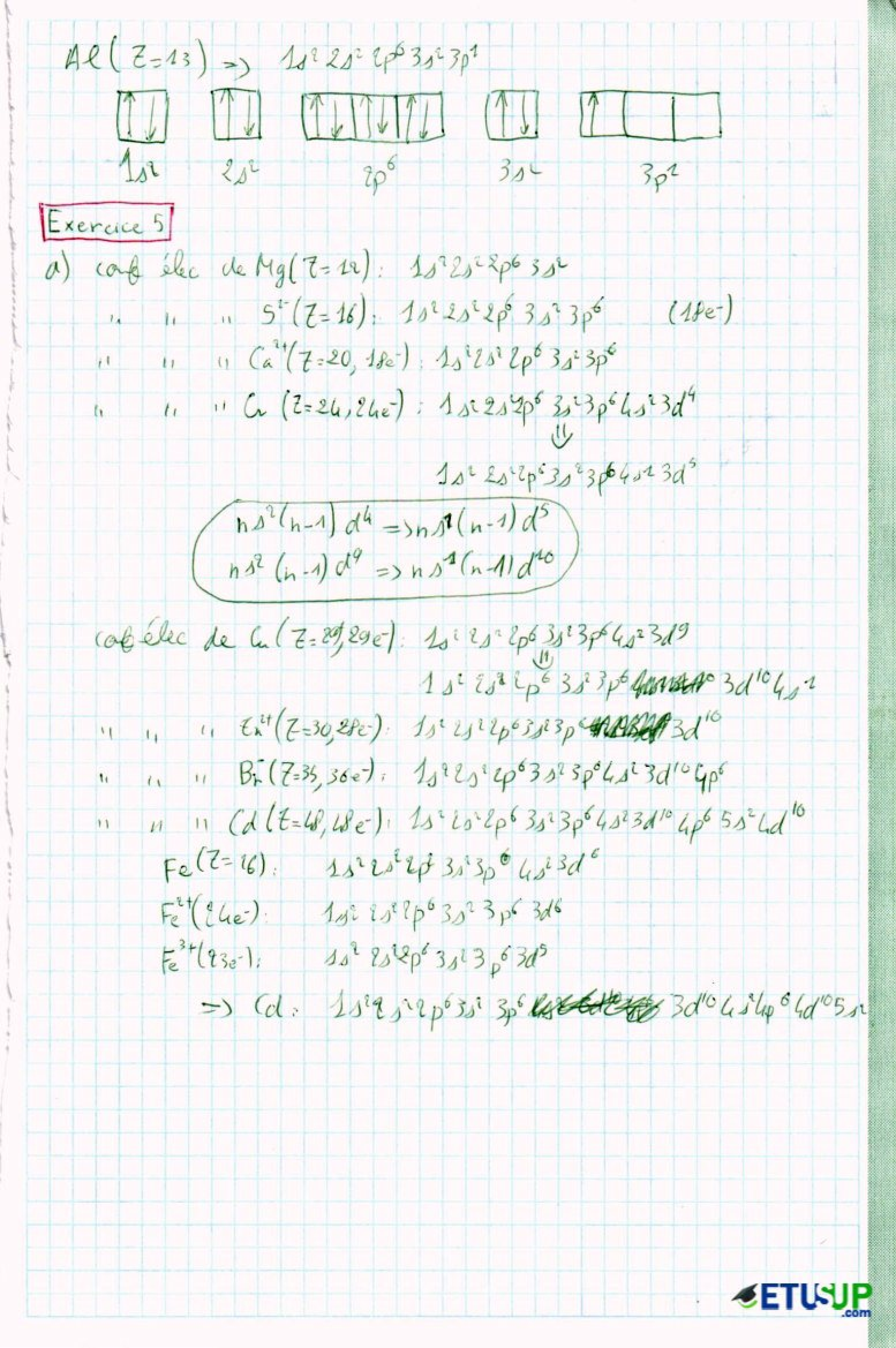
e^-	n	l	m	s
1	1	0	0	1/2
2	1	0	0	-1/2
3	2	0	0	1/2
4	2	0	0	-1/2
5	2	1	-1	1/2
6	2	1	-1	-1/2
7	2	1	0	1/2
8	2	1	1	1/2

b) C (Z=6) ⇒ $1s^2 2s^2 2p^2$

$1s^2$ $2s^2$ $2p^2$

F (Z = 9) ⇒ $1s^2 2s^2 2p^5$

$1s^2$ $2s^2$ $2p^5$



$Al\ (Z=13) \Rightarrow 1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^1$

↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓	↑↓	↑
$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^1$

Exercice 5

a) conf élec de $Mg\ (Z=12)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2$

" " " $S^{2-}\ (Z=16)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6$ $(18e^-)$

" " " $Ca^{2+}\ (Z=20,\ 18e^-)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6$

" " " $Cr\ (Z=24,\ 24e^-)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 4s^2\, 3d^4$

$\Downarrow$

$1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 4s^1\, 3d^5$

$$ns^2\,(n-1)\,d^4 \Rightarrow ns^1\,(n-1)\,d^5$$
$$ns^2\,(n-1)\,d^9 \Rightarrow ns^1\,(n-1)\,d^{10}$$

conf élec de $Cu\ (Z=29,\ 29e^-)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 4s^2\, 3d^9$

$\Downarrow$

$1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 3d^{10}\, 4s^1$

" " " $Zn^{2+}\ (Z=30,\ 28e^-)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 3d^{10}$

" " " $Br^-\ (Z=35,\ 36e^-)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 4s^2\, 3d^{10}\, 4p^6$

" " " $Cd\ (Z=48,\ 48e^-)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 4s^2\, 3d^{10}\, 4p^6\, 5s^2\, 4d^{10}$

$Fe\ (Z=26)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 4s^2\, 3d^6$

$Fe^{2+}\ (24e^-)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 3d^6$

$Fe^{3+}\ (23e^-)$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 3d^5$

$\Rightarrow Cd$: $1s^2\, 2s^2\, 2p^6\, 3s^2\, 3p^6\, 3d^{10}\, 4s^2\, 4p^6\, 4d^{10}\, 5s^2$

Exercice 6

a) Element X dont $Z(X) < 18$

$Z < 18$ donc les O.A ne sont pas concernés, puisque 'il se remplissent qu'à partir de $Z = 21$

b) X possède 3e⁻ celibataire

3e⁻ celibataires ne peuvent être que sur O.A p. Donc la répartition sera np^3 avec $n = 2$ et 3

Donc les confs possibles sont:

$1s^2 2s^2 2p^3$ $Z = 7$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ $Z = 15$

c) X possède 2e⁻ celibataires

2e⁻ celibataires ne peuvent être que sur l'OA p. Donc les répartitions possibles sont np^2 et np^4 avec $n = 2$ et 3

Donc les conf élect possibles sont

$1s^2 2s^2 2p^2$ $Z = 6$

$1s^2 2s^2 2p^4$ $Z = 8$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ $Z = 14$

$1s^2 2s 2p^6 3s^2 3p^4$ $Z = 16$

□ La case élect

[↑] e⁻ celibataire

[↑↓] 2e⁻ appariés

c) X ne possède aucun e^- célibataire

on a des O.A saturés, donc des répartitions : ns^2 et np^6

avec n = 1, 2 et 3

$1s^2$ Z = 2

$1s^2 2s^2$ Z = 4

$1s^2 2s^2 2p^6$ Z = 10

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ Z = 12

Exercice 7

a) X possède $2e^-$ de plus que le Titane

$Z(Ti) = 22 \Rightarrow n(e^-) = 24 \quad Z(X) = 24$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$

b) Y possède $3e^-$ célibataires sur L

Couche L → n = 2 → O.A 2s et 2p

$1s^2 2s^2 2p^3$; Z = 7

[↑↓] [↑ | ↑ | ↑]

$2s^2$ $2p^3$

c) W possède $4e^-$ de moins que l'Arsenic

$Z(As) = 33 \Rightarrow Z(W) = 29$

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$

Exercice 8 :

a) F . Z = 9

$$E_n = -13,6 \frac{Z^2}{n^2}$$ (H et les hydroïdes)

⇓

$$E_n = -13,6 \frac{Z^{*2}}{n^{*2}}$$ (Les atomes polyélectroniques)

$$Z_i^* = Z - \sum_j \sigma_j$$

$j > i$ $\sigma_j = 0$

$j = i$ $\sigma_j = 0,35$ sauf si $j = i = 1$ $\sigma_j = 0,31$

$j < i$ $\sigma_j = 1$ sauf si i est s ou p et $\Delta n = 1$ $\sigma_j = 0,85$

F : C.E : $1s^2 2s^2 2p^5$

Gr de Slater : $(1s^2)(2s^2 2p^5)$

e⁻ d'un même groupe possède le même Z^* de la même énergie E_i.

$Z^*_{(1s^2)} = 9 - (1 \times 0,31) = 8,69$

$Z^*_{(2s^2 2p^5)} = 9 - (2 \times 0,85 + 6 \times 0,35) = 5,2$

b) Mg (Z = 12)

C.E : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

Gr de Slater : $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2)$

$Z^*_{(3s)} = 12 - (2 \times 1 + 8 \times 0,85 + 1 \times 0,35)$

$= 2,85$

P (Z = 15)

C.E : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$

Gr de Slater : $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^3)$

$Z^*_{(3s^2 3p^3)} = 15 - (2 \times 1 + 8 \times 0,85 + 4 \times 0,35)$

$= 4,8$



* V ($Z = 23$)

C.E: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^3$

Gr de Slater: $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(3d^3)(4s^2)$

$Z^*_{(4s)} = 23 - (2\times1 + 8\times1 + 8\times0,85 + 3\times0,85 + 1\times0,35)$

$= 3,3$

Exercice 9:

Co $Z = 27$

$Co \rightarrow Co^{2+} + 2e^-$ (E_i)

$E_i = E(Co^{2+}) - E(Co)$

C.E: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$ (Co)

C.E: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7$ (Co^{2+})

Gr de Slater:

Co: $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(3d^7)(4s^2)$

Co^{2+}: $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(3d^7)$

$E_i = 2E_{(1s^2)} + 8E_{(2s^2 2p^6)} + 8E_{(3s^2 3p^6)} + 7E_{(3d^7)}$

$- 2E_{(1s^2)} - 8E_{(2s^2 2p^6)} - 8E_{(3s^2 3p^6)} - 7_{(3d^7)} - 2E_{(4s^2)}$

$E_i = -2E_{(4s^2)}$

$E_n = -13,6 \frac{Z^{*2}}{n^{*2}}$ (eV)

$Z^*_{(4s^2)} =$ ~~...~~

$= 27 - (2\times1 + 8\times1 + 8\times0,85 + 7\times0,85 + 1\times0,35) = 3,9$

$n = 4 \rightarrow n^* = 3,7$

$E_{(4s^2)} = -13,6 \times \frac{(3,9)^2}{(3,7)^2} = -15,11$ eV

D'où: $E_i = 30,22$ eV

Exercice 10:

Ca: Z = 20

C.E: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$

Gr de Slater: $(1s^2)(2s^2 2p^6)(3s^2 3p^6)(4s^2)$

$E_T(Ca) = 2E_{(1s^2)} + 8E_{(2s^2 2p^6)} + 8E_{(3s^2 3p^6)} + 2E_{(4s^2)}$

$Z^*_{(1s^2)} = 20 - (1 \times 0,31) = 19,69$

$Z^*_{(2s^2 2p^6)} = 20 - (2 \times 1 + 7 \times 0,35) = 15,85$

$Z^*_{(3s^2 3p^6)} = 20 - (2 \times 1 + 8 \times 0,85 + 7 \times 0,35) = 8,75$

$Z^*_{(4s^2)} = 20 - (2 \times 1 + 8 \times 0,85 + 8 \times 0,35 + 1 \times 0,35) = 2,85$

$E_{(1s^2)} = -13,6 \times \frac{Z^{*2}_{(1s^2)}}{(1)^2} = -5272,67\ eV$

$E_{(2s^2 2p^6)} = -13,6 \times \frac{Z^{*2}_{(2s^2 2p^6)}}{(2)^2} = -854,15\ eV$

$E_{(3s^2 3p^6)} = -13,6 \times \frac{Z^{*2}_{(3s^2 3p^6)}}{(3)^2} = -115,69\ eV$

$E_{(4s^2)} = -13,6 \times \frac{Z^{*2}_{(4s^2)}}{(3,7)^2} = -8,07\ eV$

$E_T(Ca) = -2 \times 5272,67 - 8 \times 854,15 - 8 \times 115,69 - 2 \times 8,07$

$= -18390\ eV$

$E_T(Ca) = -18,32\ KeV$




ETUSUP.com